

A T 034332 sz. OTKA téma zárójelentése

1. Bevezetés és a célok ismertetése

Az ion implantáció folyamata az anyag különböző különleges állapotát eredményezi az implantált ion és a céltárgy választása függvényében. Az eddig észlelt kísérletek alapján az implantált ion tömege, az implantációs energia nagymértékben meghatározza a kialakult végállapot szerkezetét. Az ion- implantáció szempontjából általában három anyagcsoportra oszthatóak a céltárgyak: fémek, félvezetők és szigetelők csoportjára. A csoportok az implantáció hatására ténylegesen különböző állapotokba kerülnek. Viszonylag kis energiájú implantációnál, ahol az energia veszteség mag – mag kölcsönhatás miatt történik fémek esetében az ütközési kaszkád után általában vakancia hurok alakul ki, félvezetőknél rendezetlen anyagrészek keletkeznek, ezek relatív térfogata és tényleges szerkezete a dózistól (dózis helyett ma „fluence” a hivatalos angol kifejezés) függ. Legkevésbé a szigetelők vizsgáltak. Itt a rendezetlenség szintén bekövetkezik, de a vizsgálatok azt is mutatták, hogy az implantált atom számos esetben a dózis függvényében különböző töltés állapotba kerül és eltérő fázisok is keletkezhetnek. Számos elméleti vizsgálat az ütközési kaszkád helyén rövid idő alatt előálló magas hőmérséklet („thermal spike”) alapján, továbbá újrakristályosodás (IBIEC) alapján értelmezi a kialakuló állapotot. Mindezek ellenére az ion-implantáció folyamata nem tekinthető teljesen ismertnek. Ez azért is probléma, mert az implantáció folyamata az eddigieknél is több gyakorlati célra is alkalmazható.

Kutatási céljaink két anyagcsoportra irányultak, egyrészt szigetelő kristályokban az implantáció után kialakuló fázisok meghatározására, másrészt félvezetőkben a különböző fém-szilicid fázisok keletkezési feltételeinek megismerésére. Az előbbi esetben a fázisok értelmezésére a spinell szerkezetek pontosabb megismerése, az utóbbi esetben a γ -FeSi₂ esetén a vas körüli szimmetriával kapcsolatos ellentmondások feloldása volt a cél. Az utóbbi téma kapcsolódni látszott az igen kis vastagságú fémnek a szilícium felületén történő kölcsönhatásának megismeréséhez.

A vizsgálatokat főleg Mössbauer, visszaszórás spektroszkópia, csatornahatás és ellipszometria segítségével terveztük vizsgálni. A kutatási tervbe foglaltaknak megfelelően, az alábbi feladatokkal foglalkoztunk:

- Az ⁵⁷Fe-al implantált Al₂O₃ kristályokat vizsgáltuk és meghatároztuk a dózis függvényében az ⁵⁷Fe ion végállapotait.
- Hőkezelés alkalmával meghatároztuk a fenti rendszerek stabil állapotait.
- Az azonosításhoz részletes vizsgálatokat végeztünk spinell kristályokon a kvadrupól felhasadás pontos meghatározására és értelmezésére.
- Az IBIEC módszerrel előállítható γ -FeSi₂ szerkezetére vonatkozóan végeztünk vizsgálatokat.

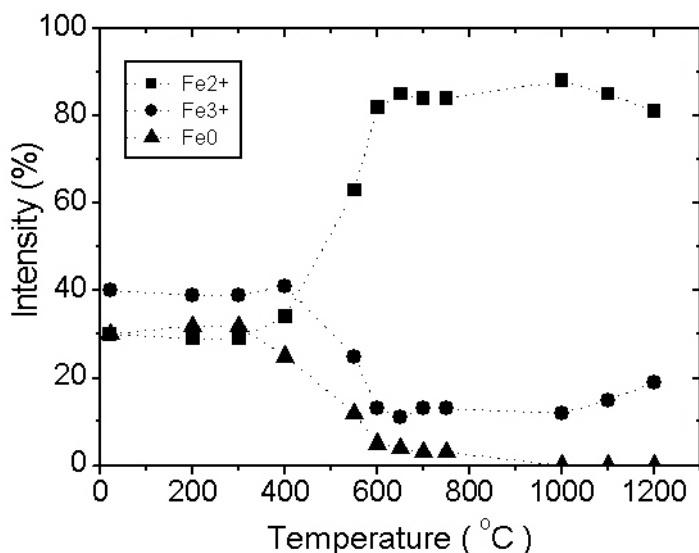
Tekintettel arra, hogy intézetünkben eddig a kaszkád generátorban nem tudták üzembe helyezni a nagyáramú ionforrást és a Leuven-i egyetemen működő implanter sem volt hosszú ideig üzemképes állapotban éppen akkor amikor ⁵⁷Fe-t kellett volna implantálni, ezért terveinket bizonyos tekintetben módosítani kellett. Ezért nagyobb súlyt helyeztünk az ion-implantációval szilíciumban előállított és különböző módszerekkel kezelt Fe-szilicidok kialakulásának meghatározására. A téma mögötti motiváció az integrált áramkörökben és termofeszültség forrásként alkalmazható β -FeSi₂ előállítása volt. A β -FeSi₂ félvezető és 0.87 eV direkt sávval rendelkezik, ami infravörös emitter és detektor alkalmazását tenné lehetővé. GeTe kristályban a dózis függvényében megvizsgáltuk implantáció hatására hogyan módosul a belső szerkezet. Crystal-TRIM módszer alkalmazásával kiszámoltuk, hogy az ion-implantációval bejuttatott Te környezetében milyen mértékű rácskárosodás várható.

2. Kutatási eredmények

2.1 Ion-implantát szigetelők fázisai és változások hőkezelés után

Az ^{57}Fe -al implantált $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ kristályokat korábban részletesen vizsgálták, lényegében modell rendszernek tekinthető. Ennek ellenére a kialakuló szerkezetek, fázisok, atomi töltésállapotok, kölcsönhatások és az egyensúlyra vezető folyamatok magyarázata hiányos maradt. Korábban végzett vizsgálatok során megfigyelték, hogy ha ^{57}Fe -t implantáltak $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ kristályba, akkor az implantált atomok a Fe helyeken foglalnak helyet viszonylag kisebb dózis értékeknél. Ugyanezt figyeltük meg ha ^{57}Co -t implantáltunk $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ -be, ami meglepő, mert általában szigetelő kristályban az EC bomlás után utóhatás lép fel és a Fe különböző töltésállapotai (Fe^{2+} , Fe^{3+}) jelennek meg.

Különböző dózis mellett implantált $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ esetén a mért Mössbauer spektrum bonyolult, azt több komponenssel lehet illeszteni. Három komponens volt azonosítható. Egy – egy viszonylag nagy, illetve kis kvadrupól felhasadást mutató dublett és egy szinglett. Ezeket sorban paramétereik alapján Fe^{2+} , Fe^{3+} , és Fe^0 töltésállapotú ionokkal, illetve atommal lehet azonosítani. Kérdés az, hogy ezek milyen környezetben foglalnak helyet. Több korábbi kísérletet végeztek e célból. Hőkezelést alkalmaztak, de ez nem vezetett eredményre, mert a paraméterek az ionok töltésváltozása miatt eltolódtak. Mi különböző gázokban történő hőkezelést végeztünk azzal a céllal, hogy az esetleges töltésváltozást kontroll alatt tarthassuk. Ily módon megállapítottuk, hogy oxidáló atmoszférában Fe^{3+} ionok keletkeznek, paraméterük megegyezik azzal, amikor viszonylag kis mennyiségű Fe_2O_3 -t nagyobb mennyiségű Al_2O_3 -al szintereltünk. A viszonylag bonyolult fázis diagram szerint a hozzáadott mennyiségű Fe_2O_3 esetén elegykristály keletkezik, tehát a Fe^{3+} helye megegyezik az Al^{3+} ionéval. Az implantált minta hidrogénben végzett hőkezelése csak annyiban volt eredményes, hogy az összes vas ionokat Fe atomra redukálta, melynek paramétere egyezett a nanoméretű vas részecskéivel. Ez a fázis iom-implantáció esetén igen nagy $> 10^{16}$ atom/cm² dózis alatt ténylegesen keletkezik. A Fe^{2+} ionokat korábban Fe-spinell keletkezésével azonosították, annak ellenére, hogy paraméterei eltértek a pontosan meghatározott (normal) FeAl_2O_4 spinelltől.

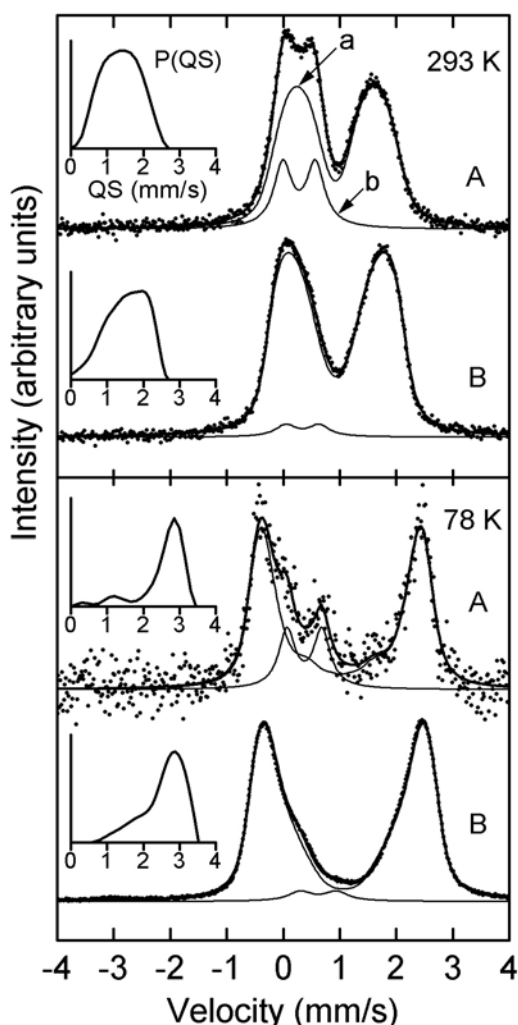


1. ábra Az ^{57}Fe -val 6×10^{16} ion/cm² dózissal implantált és kis parciális nyomású H_2 -ben hőkezelt mintában lévő ionok relatív intenzitása.

További probléma volt, hogy az irodalomban közölt paraméterek is eltéréseket mutattak. Ezért ezt a problémát részletesen vizsgáltuk. Fe^{2+} iont tartalmazó spinellt csak meghatározott parciális redukáló ágenszt tartalmazó atmoszférában lehet előállítani. E célra $\text{H}_2 : \text{CO}_2 = 1 : 2$ összetételű gázkeveréket alkalmaztunk. A keletkező anyag szerkezetét röntgen diffrakcióval ellenőriztük és az egyértelműen spinell szerkezetet mutatott. Ennek hiperfinom paramétereit összehasonlítottuk az implantált mintában lévő Fe^{2+} paramétereivel, amelyek határozott eltérést mutattak. Az eltérést esetleg lehetett volna tulajdonítani annak, hogy implantáció során helyileg gyors lehűlés történt.

Ezért a szintetizált spinellt is felmelegítettük és gyorsan lehűtöttük, de paramétereinek értéke szobahőmérsékleten maradtak a fűtés előttié. Az implantált mintát hőkezeltük a FeAl_2O_4 spinellhez használt gázkeverékben és azt kaptuk, hogy ebben az esetben ténylegesen a spinell

paraméterei jelentek meg, kisebb intenzitásban a Fe^{3+} paraméterei is. Alacsony hőmérsékleten is megmértük a spektrumot, ott is spinell spektrumot kaptunk (2. ábra).



2. ábra Az ^{57}Fe implantált és hőkezelt minta (A) és FeAl_2O_4 (B) spektrumai különböző hőmérsékleten mérve. a: Fe^{2+} , b: Fe^{3+}

effektus hozzájárul a szimmetria csökkenéséhez. Ennek ellenére több olyan eredmény volt, ahol csak egyvonalas spektrumot lehetett észlelni a Fe^{2+} tartalmú spinellben vagy a szimmetria köbösnél alacsonyabb volt, de a kooperatív effektus léte mégsem volt bizonyítható. További kérdés az, ha a Mössbauer mérés ^{57}Co forrás mintán történik, akkor kérdés, hogy utóhatás jelentkezik-e. Mindezen kérdések megválaszolására részletes vizsgálatokat végeztünk, amelynek eredményei röviden a következőkben foglalhatók össze.

Különböző Fe illetve Co tartalmú MgAl_2O_4 , CoAl_2O_4 , FeCr_2O_4 , FeV_2O_4 , ZnAl_2O_4 spinell kristályokat szintetizáltunk és röntgen diffrakcióval ellenőriztük szerkezetüket. A Mössbauer spektrumokat 4.2 és 1200 K között mértük meg. Annak ellenére, hogy ^{57}Fe tartalmú ZnAl_2O_4 esetén, szobahőmérsékleten egyvonalas Mössbauer spektrumot észlelték korábban, bebizonyosodott, hogy alacsony hőmérsékleten mégis viszonylag nagy kvadrupól felhasadás mérhető ugyanúgy, mint minden más, vas tartalmú spinell esetén. Két lehetséges esetet figyeltünk meg: a hőmérséklet csökkenésével a felhasadás értéke folytonosan növekedett, vagy egy adott hőmérsékleten még hirtelen meg is változott az értéke. Az utóbbi ment végbe FeCr_2O_4 , FeV_2O_4 esetén, ahol hűtés esetén köbös \rightarrow tetragonális fázisátalakulás megy végbe. A többi esetben fázisátalakulás nem ment végbe, ezt a különböző hőmérsékleten mért röntgen diffrakció mérése

Az ábrán 5×10^{16} atom/cm² dózissal implantált és hőkezelt Al_2O_3 spektruma látható. Mindkét minta Mössbauer spektrumai a kvadrupól felhasadás érték eloszlásával illeszthetők. A b komponens Fe^{3+} ionhoz rendelhető, amely az Al_2O_3 alsó részbe diffundált és ott az Al^{3+} iont helyettesíti.

Mindezek alapján az a következtetés vonható le, hogy az implantált Fe^{+} a dózis függvényében három formában stabilizálódik: kis dózis esetében Fe^{2+} formálódik, de nem spinell szerkezetben van, hanem rendezetlen szerkezet veszi körül. A spinellben lévő Fe^{2+} tetraédes környezetben van, ez az implantált Al_2O_3 rácsában igen nehezen képződhet. A Fe^{3+} az Al_2O_3 rácsában helyettesíti az Al^{3+} ionokat és az O^{2-} trigonálisan torzult oktaéderjeiben foglal helyet. Nagyobb dózis esetén a nagy Fe koncentráció miatt már nem keletkezik ionos állapot, hanem vas ionok semlegesítődnek, atomok keletkeznek, amelyekből a dózis függvényében a rács belsejében különböző méretű klaszterek formálódnak.

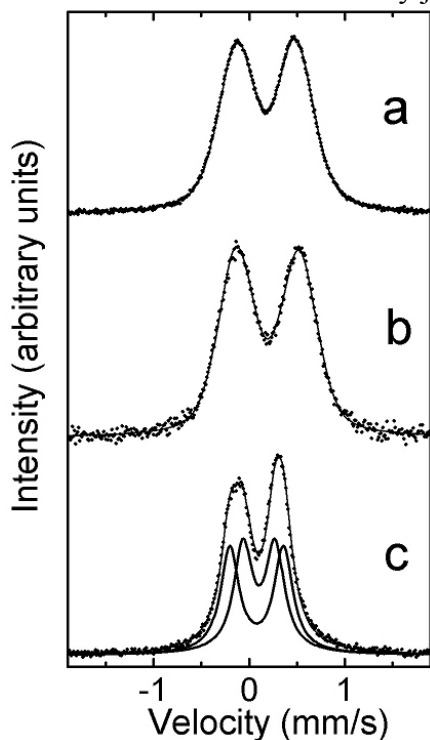
További probléma az, hogy mi okozza a vas tartalmú spinellekben a hiperfinom paraméterek eloszlását. Ezért széles hőmérséklet tartományban megmértük a vas-spinell Mössbauer spektrumait. Mössbauer spektroszkópiával több spinellt vizsgáltak, de az eredmények számos esetben eltéréseket mutattak. A spinell (MgAl_2O_4) szerkezete régóta ismert. A szerkezet az O^{H} (Fd3m) köbös tércsoporttal jellemezhető. Az elemi cella 32 szorosan pakolt oxigén atomból áll, a kationok a tetraédes és oktaédes rácsközi helyeken vannak. A hosszú idő óta végzett kutatások ellenére a spinell szerkezetben lévő átmeneti fémek kölcsönhatásai nem ismertek pontosan. Fe^{2+} ionokat tartalmazó spinellek esetén ismeretes, hogy a kooperatív Jahn – Teller

mutatta. A növekedés mértéke főleg a valencia elektronok által keltett elektromos térgradiensnek tulajdonítható. A Fe^{2+} esetén a d elektronok alap állapotfüggvénye a Jahn - Teller effektus miatt felhasad és ezek populációjának mértéke miatt változhat meg a térgradiens értéke a hőmérséklet függvényében. A felhasadás értéke és hőmérséklettől való függése a felhasadás energiájától függően kiszámolható. Ez azonban viszonylag szélesebb hőmérséklet tartományban nem volt lehetséges mutatva, hogy nemcsak a valencia elektronok keltik a térgradienst, hanem az alacsony szimmetriával elhelyezkedő rácsatomok is. Itt egyrészt az inverzió miatt a második legközelebbi szomszédok között elhelyezkedő ionok, másrészt a Fe^{2+} környezetében a legközelebbi szomszéd atomok helyzetének változása a hőmérséklet függvényében változhat, ilyen változást már kimutattak.

Az utóhatás vizsgálata során a ^{57}Co tartalmú minták közül azok nem mutattak effektust, amelyekben a vas sztöchiometrikus alkotó része volt a spinell molekulának. Ez az egyezés azonos a Co^+ és Fe^+ ionokkal implantált $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ minták esetén megfigyelt jelenséggel, ahol az implantát Co és Fe atomok a céltárgy Fe^{3+} ionjaival teljesen azonos hiperfinom spektrumot mutattak, jelezve, hogy az adott dózis mellett a rácsban teljesen azonos helyet foglalnak el az implantát atomok. Ekkor a ^{57}Co bomlása után utóhatás nem jelentkezik. ^{57}Co -al implantált $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ esetén és érdekes módon CoAl_2O_4 spinellben az utóhatás jelentkezik, a Fe^{2+} és Fe^{3+} ionok spektrumai együttesen jelennek meg. Általunk észlelt új jelenség volt, hogy az ^{57}Co és ^{57}Fe tartalmú ZnAl_2O_4 spinell lényegében azonos szerkezetű spektrumot mutatott. viszont, 4,2 K-en a ^{57}Co forrás spektrum a ^{57}Fe tartalmú minta magasabb hőmérsékleten észlelt spektrumát mutatta, jelezve azt, hogy a Mössbauer effektus karakterisztikus ideje alatt a magbomlás után a felhasadt d nívók egyensúlyi populációja a vas ionban még nem állt helyre.

2.2 Ion-implantáció után keletkező Fe-szilicid fázisok

Az átmeneti fém szilicideknek mind képződési mechanizmusuk megismerése, mind gyakorlati alkalmazásuk miatt van komoly jelentősége.



3. ábra a: IBIEC módszerrel előállított, b: MBE- ben 7ML Fe leválasztásával előállított $\gamma\text{-FeSi}_2$, c: 15 ML leválasztásával előállított $\beta\text{-FeSi}_2$ Mössbauer spektrumai

$\gamma\text{-FeSi}_2$ fázis metastabilis és „ion beam epitaxial crystallization” (IBIEC) módszerével állították elő Fe-al implantált Si belsejében úgy, hogy az implantáció után az implantált réteget 600 C°-on Si-al implantálták. Ez a módosulat köbös fluorit típusú szerkezetben kristályosodik, amelyet TEM mérések igazoltak. Ennek ellenére a Mössbauer spektruma viszonylag nagy kvadrupól felhasadást mutat, tehát köbösnél alacsonyabb szimmetriát jelez a vas közelében. A szintén fluorit szerkezetű CoSi_2 -be implantálással és szintézissel is viszonylag kis (1 atom %) mennyiségű ^{57}Fe -t juttattunk be, ezek esetében viszont egy vonalas spektrumot észleltünk, ami az előző eredményhez viszonyítva ellentmondásra vezetett. Ezért további vizsgálatokat végeztünk. Előállítottunk $\gamma\text{-FeSi}_2$ -t az IBIEC módszerrel és ellenőriztük a kapott Mössbauer spektrumot. Mi is ugyanazt a kvadrupól felhasadás értéket kaptuk, amelyet korábban publikáltak. A Si-on UHV közegben molekulanyaláb módszerrel (MBE) magas hőmérsékleten (580 C°) különböző vastagságú Fe rétegeket választottunk le és Mössbauer módszerrel vizsgáltunk. A spektrumok a 3. ábrán láthatók. Abban az esetben, amikor a vastagság 10 ML volt, akkor ugyanazt a kvadrupól felhasadás értékeket kaptunk, mint az IBIEC-el előállított $\gamma\text{-FeSi}_2$ esetén. Vastagabb mintánál (15 ML) a $\beta\text{-FeSi}_2$ -re jellemző paramétereket mértünk. A magyarázat a következő: a

leválasztott Fe a Si (111) felületén FeSi_2 összetételű vegyületet képez. A felületen metastabil köbös epitaxiális klaszter réteg képződik fluorit típusú szerkezettel. A Si és a $\gamma\text{-FeSi}_2$ rácsállandója közötti különbség miatt előálló feszültséget a rácsok, főleg a vékony $\gamma\text{-FeSi}_2$ rácsának tetragonális torzulása csökkenti, így viszont elektromos kvadrupól térgradiens lép fel a vas ionnál, ezért kvadrupól felhasadt spektrumot észlelünk. További torzító tényező lehet a vas esetében a Jahn Teller effektus is. Ugyanez történik a Si belsejében is, a $\gamma\text{-FeSi}_2$ kis mérete miatt keletkezhet, ezért ugyanolyan szerkezete van, mint a felületen képződőnek. Tömbi CoSi_2 -ben ez nem következik be, mert a rács belsejében a Co Si kötéserősség miatt a kis mennyiségű vas nem tudja torzítani a rácsot. Kissé nagyobb mennyiség esetén fázis szeparáció következik be [Dézsi I. et al. J. Appl. Phys. 92 (2002) 3668]. Az eredményt publikáljuk.

Befejeztük a korábban kezdett vizsgálatokat a Co helyének meghatározására $\beta\text{-FeSi}_2$ -ban. Megmutattuk, hogy a Co helyettesíti 1 : 1 arányban a rácsban két különböző helyen vas atomot. Az eredményt publikáltuk.

A $\beta\text{-FeSi}_2$ stabil fázis és igen jelentős gyakorlati alkalmazása lehet, amint azt a bevezetőben is említettem. Az optoelektromos alkalmazáshoz a Si-ra epitaxiálisan növesztett $\beta\text{-FeSi}_2$ rétegre lenne szükség. E cél elérésére intenzív kutatások folynak különböző módszerek alkalmazásával. Si belsejében sikerült a rácshoz illeszkedő fázist létrehozni, de ezt a felületen lenne szükséges kialakítani. Eddig ilyen réteget megbízhatóan még nem sikerült létrehozni. A Kazan-i Technológiai Intézetből megkerestek bennünket lézer besugárzással kezelt Si-ba implantált Fe-t tartalmazó rétegek vizsgálatában történő együttműködésre. Az első fő feladat a különböző energiával kezelt rétegekben a Fe mélységi eloszlásának meghatározása. Ezt a feladatot nagyon sok minta esetén elvégeztük, amelyek közlésre is kerültek, ezért itt részletesen nem számolok be ezen eredményekről.

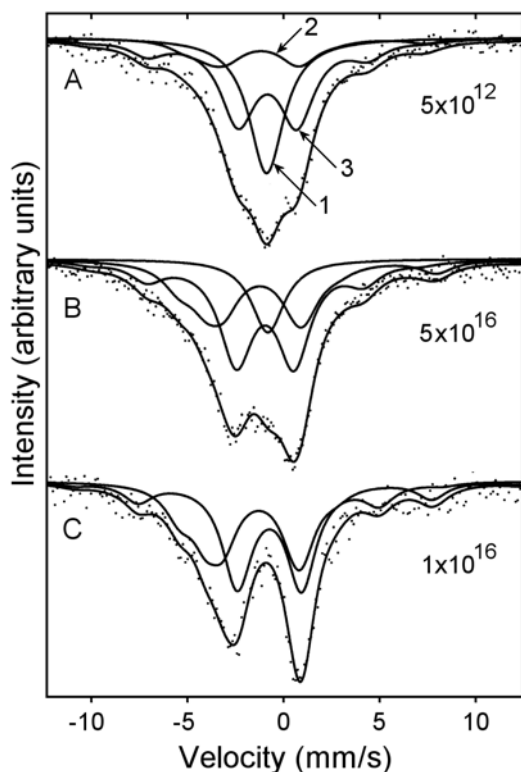
A küldött mintákat ellipszométerrel is megvizsgáltuk. A 40 keV energiájú Fe ionokkal implantált (dózis= $1,8 \times 10^{17}$ ion/cm²) és 1,4 J/cm² energiasűrűségű lézerimpulzussal kezelt szilícium ellipszometriai spektrumának értelmezése céljából kétréteges optikai modellt konstruáltunk. Az egykristályos szilícium felületen lévő réteget $\beta\text{-FeSi}_2$ -nek, a levegővel érintkező réteget szilíciumdioxidnak feltételezve valamint ezeknek a rétegeknek a vastagságát szabad paraméternek tekintve hajtottuk végre a kiértékelést. Jónak mondható illeszkedés adódott a mért és a szimulált spektrumok között. Ez után azt feltételeztük, hogy az egykristályos szilícium szubsztráton levő réteg $\beta\text{-FeSi}_2$ és relaxált amorf szilícium keveréke. A relaxált amorf szilícium komplex dilektromos függvényét egy korábbi munkában határozták meg [Fried et al. J. App. Phys. 71 (1992) 5260]. A keverékek optikai tulajdonságainak meghatározására alkalmas Bruggeman féle effektív közegközelítés adta lehetőséget felhasználva konstruáltuk meg az optikai modellt. Lényegesen jobban illeszkedett a mért spektrumhoz a szimulált spektrum, mint azt az előbbi kiértékelésnél tapasztaltuk.

A mérés kiértékelés során az adódott, hogy közel 55 nm vastag réteg van az egykristályos szilícium szubsztráton, ez a réteg közel 90 térfogatszázalék $\beta\text{-FeSi}_2$ -t és 10 térfogatszázalék relaxált szilíciumot tartalmaz. Az 55 nm vastag keverékréteg tetején közel 7 nm vastag oxidréteg volt.

A SiC kristályok szerkezetmódosítása gyakorlati alkalmazásuk érdekében nagyon időszerű feladat. Ionimplantációval amorfizált és magas hőmérsékleten hőkezelt SiC egykristályok szerkezeti és optikai tulajdonságainak módosulását vizsgáltuk csatornahatással kombinált ionvisszaszórással és spektroszkópiai ellipszometriával. Az ion visszaszórásos méréseket 3,5 MeV energiájú He^+ ionokkal végeztük, ennél az energiánál és 165° szórási szögnél a szénre vonatkozó szórási hatáskeresztmetszet körülbelül hatszor nagyobb mint a Rutherford szórási hatáskeresztmetszet. Ezzel lehetővé vált a szén alrácsban lejátszódó jelenségek vizsgálata is. A középső és a legnagyobb dózisú minták esetén az optikai tulajdonságok körülbelül ugyanolyan mértékű rács visszarendeződésre, újrakristályosodásra utaltak, mint a legkisebb dózisú minta esetén. Az ionsugaras vizsgálatok viszont nagymértékű rácsrendezetlenséget jeleztek ezekben a mintákban. Ez arra utal, hogy a mintákban a magas hőmérsékletű hőkezelés nem hozott létre epitaxiális

újrakristályosodást. Valószínűleg polikristályos szerkezet alakult ki. Az egyes krisztallitok orientációja olyan mértékben tért el az egykristályos hordozó orientációjától, hogy a szerkezet az ionsugaras vizsgálat számára rendezetlennek mutatkozott.

2.3 ^{129}Te ion-implantációja után keletkező fázisok



4. ábra ^{129}Te -al különböző dózis mellett implantált A, B: c-GeTe, C: amorf GeTe minták Mössbauer spektrumai. 1: szinglett, 2,3 kvadrupól felhasadt komponensek.

Az ion-implantáció dózis függése esetén feltételezzük, hogy még viszonylag kis dózis esetén is, ha amorf szerkezetet könnyen formáló komponens az egyik alkotórésze az implantálandó kristálynak, akkor az ütközési kaszkád helyén amorf szerkezet keletkezik. A Mössbauer effektus alkalmas módszer a kérdés tisztázására. Ezért a GeTe-t választottuk a folyamat vizsgálatára, mert ez a vegyület igen könnyen képez amorf szerkezetű fázist. ^{129}Te ionokkal különböző dózis mellett implantáltunk kristályos és amorf szerkezetű fázisokat. A mért spektrumok a 4. ábrán láthatók. 5×10^{12} ion/cm² dózis mellett három komponens jelenik meg (A), ami még az 5×10^{16} ion/cm² dózissal implantált mintánál is látható (B). Az 1 számú komponens egy szinglett, ami azt jelzi, hogy az implantált atom a kristály a köbös szimmetriájú környezetben van ugyanúgy, mint a stabil kristályos GeTe-ban. A IV-VI csoportbeli GeTe rácsa kissé torzult köbös NaCl (B1) típusú kristályrács így a Te első szomszédai 8 Ge atom. A másik két komponens jellemző az amorf szerkezetre, ezt korábban más amorf anyagok esetében több esetben megfigyeltük és azonosítottuk. Az amorf GeTe-ba implantált ^{129}Te csak két komponensű spektrumot mutat, ami jellemző több kovalens kötésű amorf fázisokra. A vizsgálatok alapján az a következtetés vonható le, hogy az implantált ion

egy része kristályos környezetbe kerül. Ennek lehet az oka az, hogy kis dózis mellett a bevitt ion egy része az ütközési kaszkádon kívül, a Te közel köbös szimmetriájú környezetű rácshelyére kerül. A kérdés tisztázására mivel a molekuladinamika programunk nincs, Ster András (KFKI MFA) együtt a Crystal-TRIM programmal számításokat végeztünk arra vonatkozóan, hogy különböző dózis mellett mi a valószínűsége annak, hogy a primer ion körül az ütközés során a különböző távolságon mennyi vakancia keletkezik. Ebből megbecsülhető azon atomok száma, amelyek a kaszkádon kívül helyezkedik el Te rácsponton. A vizsgálatok speciális jellege miatt igen nagy számítógépes kapacitásra volt szükség. A hagyományos módszerektől eltérően ugyanis, amikor általában a mélységi eloszlásra van szükségünk, a jelenlegi módszer megköveteli, hogy megtartsuk és felhasználjuk mind a 3 koordinátát a megállt és a kilökött atomok esetében is. Sőt, az effektust csak akkor tudjuk tanulmányozni igazán, ha az összes kaszkád jellegű folyamat összes lépését nyomon követjük. A módszer annál pontosabb, minél nagyobb felületet választunk a besugárzott területnek, azaz minél nagyobb számú ion belövését szimuláljuk le. Az eddigi számítások azt mutatták, hogy az 5×10^{16} ion/cm² dózissal implantált mintánál már a kísérletileg mért értékhez viszonyítva a számolt atomok aránya, amelyek a kaszkádon kívül vannak sokkal kisebbek. Ezen eredmények arra mutatnak, hogy kristályos fázisban az atomi rendezetlenség nem azonos szerkezetű, mint a ténylegesen amorf fázisokban. Az eredmény közlése folyamatban van.